

Paint formulation for objectively-predictable and quantified coating appearance

Publication number: DE19652885
Publication date: 1998-06-25
Inventor: CLOPPENBURG HEINER (DE); SCHMITTMANN DIRK (DE); GRUENWALD THILO (DE)
Applicant: BASF COATINGS AG (DE)
Classification:
- **International:** C09D7/00; G01J3/46; G01N21/55; C09D7/00; G01J3/46; G01N21/55; (IPC1-7): C09D17/00; C09D7/14; C09D5/29; C09D5/36; C09D5/38; G01N21/31
- **European:** C09D7/00; G01J3/46; G01N21/55
Application number: DE19961052885 19961218
Priority number(s): DE19961052885 19961218

Report a data error here

Abstract of DE19652885

A novel method is used to manufacture a paint. This forms a coating with predetermined optical characteristics $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$. The paint components $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ produce optical effects with optical characteristic parameters $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots, p_x$ associated with the paint components cited above. These components are admixed in concentrations $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ with a practically optically-neutral binder. The concentrations are calculated using a physical model of a coating made from the paint with air/coating interface and internal optical characteristics arising from visible ray emission processes, with consideration of the characteristic parameters allocated to the paint components, and adjustment in a mixing stage. The physical model is based on simulation of trajectories of a number of virtual primary photons radiated into the virtual coating with the given characteristics.

Data supplied from the esp@cenet database - Worldwide



①⑨ **BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND**



**DEUTSCHES
PATENTAMT**

⑫ **Offenlegungsschrift**
⑩ **DE 196 52 885 A 1**

⑳ Aktenzeichen: 196 52 885.2
㉔ Anmeldetag: 18. 12. 96
㉕ Offenlegungstag: 25. 6. 98

㉙ Int. Cl.⁶:
C 09 D 7/14
C 09 D 5/29
C 09 D 5/36
C 09 D 5/38
G 01 N 21/31
// C09D 17/00

DE 196 52 885 A 1

㉚ Anmelder:
BASF Coatings AG, 48165 Münster, DE

㉛ Vertreter:
Dres. Fitzner, Münch & Jungblut, Rechts- und
Patentanwälte, Ratingen-Berlin, 40878 Ratingen

㉜ Erfinder:
Cloppenburg, Heiner, 48167 Münster, DE;
Schmittmann, Dirk, 48165 Münster, DE; Grünwald,
Thilo, 48151 Münster, DE

㉞ Entgegenhaltungen:
FR 01 76 140 A2
BRAUN, F.: Farbe und Lack (1973), S. 28-34;
GLÄSER, F.: Farbe und Lack (1973), S. 614-621;

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen

Prüfungsantrag gem. § 44 PatG ist gestellt

㉟ Verfahren zur Herstellung eines Lackes

㊱ Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur Herstellung eines Lackes, aus welchem ein Überzug mit vorgegebenen optischen Eigenschaftswerten erzeugbar ist, wobei optische Effekte erzeugende Lackkomponenten mit den Lackkomponenten zugeordneten optischen Eigenschaftsparametern in Konzentrationen einem optisch praktisch neutralen Bindemittel zugemischt werden. Die Erfindung lehrt hierzu, daß die Konzentrationen mittels eines Rechners unter Einsatz eines physikalischen Modells der an der Grenzfläche Luft/Überzug und im Überzuginneren eines aus dem Lack hergestellten Überzuges mit optischen Eigenschaftswerten auftretenden optischen Strahlungsprozesse bei Berücksichtigung der den Lackkomponenten zugeordneten Eigenschaftsparametern berechnet und in einer Mischverfahrensstufe eingestellt werden. Im einzelnen beruht das physikalische Modell im wesentlichen auf der Simulation der Trajektorien einer Mehrzahl von auf einen virtuellen Überzug mit den vorgegebenen Eigenschaftswerten eingestrahelter virtueller Primärphotonen.

DE 196 52 885 A 1

Beschreibung

Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur Herstellung eines Lackes, aus welchem ein Überzug mit vorgegebenen optischen Eigenschaftswerten $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ erzeugbar ist, wobei optische Effekte erzeugende Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ in Konzentrationen $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ einem optisch praktisch neutralen Bindemittel zugemischt werden. – Der Ausdruck Lack bezeichnet in aller Allgemeinheit ein Überzugsmittel zur Beschichtung eines Substrates mit einem Überzug. Neben dem Schutz des Substrates vor schädigenden Umwelteinflüssen, wie beispielsweise mechanische oder chemische Angriffe, dient ein Überzug in den meisten Anwendungen auch dekorativen Zwecken, wozu farb- und/oder effektgebende Lackkomponenten dem optisch praktisch neutralen Bindemittel des Lackes zugemischt werden. Optisch neutral meint hierbei, daß ein nur mit dem Bindemittel (und Lösungsmittel, ggf. mit üblichen Hilfsstoffen) hergestellter Lack einen einem menschlichen Betrachter transparent oder diffus farblos erscheinenden Überzug ergibt. Ein herausragendes Beispiel für die Anwendung dekorativer Lacke ist der Bereich der Kfz-Lackiertechnik. Dekorative Farbeffekte werden in erster Linie durch Zugabe von Farbmitteln, beispielsweise organische oder anorganische Pigmente, als Lackkomponenten zu dem in der Regel (aber nicht zwingend) transparenten Bindemittel des Lackes hervorgerufen. Einen solchen Lack bezeichnet man als Uni-Lack. Zusätzlich können mit Effektpigmenten als ergänzende Lackkomponenten weitere optische Effekte hervorgerufen werden. Einen solchen Lack bezeichnet man als Effekt-Lack. Der Ausdruck optische Effekte umfaßt dabei sowohl die Farbeffekte der Uni-Lacke als auch die kombinierten Effekte durch Farbmittel und Effektpigmente. Ein dekorativer metallischer Spiegeleffekt kann mittels Metallic-Effekt-Pigmente, beispielsweise plättchenförmige Aluminiumflitter, erzeugt werden. Dekorative Interferenzeffekte sind mittels sogenannter Interferenzpigmente bzw. Micas erzielbar. Micas sind meist plättchenförmige Partikel aus praktisch transparentem Rumpfmateriale mit einem Brechungsindex in der Größenordnung der umgebenden Bindemittelmatrix, wobei die Außenflächen mit einer optisch sehr hoch brechenden Beschichtung, beispielsweise aus Metalloxiden, ausgestattet sind. Sind einem Lack (neben den Farbmitteln) Metallic-Effekt-Pigmente und/oder Micas zugegeben, so entstehen auf einen Betrachter (gewünschte) Effekte mit beachtlicher Anisotropie. Abhängig von der Betrachtungsrichtung variiert nämlich der Helligkeits- und Buntheitseindruck (goniochromatischer Effekt). Im Falle der Micas tritt eine Variation des Farbtones hinzu. Es versteht sich, daß die beispielhaft genannten Effektpigmente keine Beschränkung darstellen. Die Erfindung ist grundsätzlich bei allen Arten von Pigmenten einsetzbar.

Herstellungstechnisch werfen die aus dekorativen Gründen gewünschten Varianten eines Lackes folgende Probleme auf. Zunächst ist es bereits schwierig, die Farbe eines Überzuges aufgrund der eingesetzten Konzentrationen der farbgebenden Lackkomponenten in voraus exakt zu bestimmen. Verstärkt wird diese Problematik wenn die oben genannten Effektpigmente als weitere Lackkomponenten eingebaut werden sollen. Soll zudem ein Lack produziert werden, aus dem Überzüge herstellbar sind, deren optischer Eindruck exakt jenem einer Vorlage entspricht, so ist dies besonders schwierig, da selbst geringste Abweichungen einem farb-tüchtigen menschlichen Betrachter auffallen. Diese Problematik stellt sich zum Beispiel im Bereich der Kfz-Reparatlackiertechnik, in welcher im Rahmen einer Reparatur lediglich ein Teilbereich eines Kfz's neu lackiert wird. Aber auch bei der Fahrzeugserienlackierung muß eine hohe Re-

produzierbarkeit gewährleistet sein, wobei die Anforderungen hier sogar höher sein können, als im Reparaturbereich. Aus diesen Gründen müssen Beurteilungskriterien aufgestellt werden zur Beurteilung der optischen Eigenschaften eines Überzuges und diese Kriterien mit Rezepturangaben zur Herstellung eines den Vorgaben entsprechenden Lackes korreliert werden. Hierbei bezieht sich der Begriff der Rezepturangaben im wesentlichen auf die Art der Farbmittel und ggf. der Effektpigmente sowie deren Konzentrationen im Lack.

Ein Verfahren der eingangs genannten Art ist aus der Praxis bekannt. Bei dem insofern bekannten Verfahren wird bei den Uni-Lacken und insbesondere bei den Effekt-Lacken mit einer visuellen, auf menschliche Erfahrung beruhenden Arbeitsweise vorgegangen. Ein Kolorist beurteilt den Farbton und ggf. den Effekt einer Überzugsvorlage, bildet dabei mittels seines Farbempfindens subjektive optische Eigenschaftswerte und schlägt eine mögliche Rezeptur hinsichtlich der Konzentrationen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten für eine Nacharbeitung vor. Als Hilfsmittel dienen dabei Farbtafeln mit bekannten Pigmentrezepturen, die mit der Überzugsvorlage verglichen werden. Bei noch vorhandenen Abweichungen eines nach der vorgeschlagenen Rezeptur hergestellten Überzuges gegenüber der Überzugsvorlage bestimmt der Kolorist Korrekturwerte für vorzugsweise wenige Pigmentkonzentrationen oder für nur eine einzige Pigmentkonzentration als Differenzkonzentrationen. In aller Regel sind eine Mehrzahl von Korrekturschritten erforderlich, ehe das Ergebnis befriedigt. Diese Vorgehensweise ist sehr subjektiv und hängt neben der (oft von der Tagesform abhängigen) Beurteilungsfähigkeit des Koloristen auch in starkem Maße von der Erfahrung des Koloristen sowie von den Beurteilungsbedingungen, wie beispielsweise der Art der Beleuchtung (Einfallrichtung, Farbtemperatur der Lichtquelle, etc.), ab. Zudem ist es sehr aufwendig, gleichsam im Wege der sukzessiven Approximation mit vielen Korrekturschritten zu arbeiten, da im Rahmen jedes Korrekturschrittes ein neuer Lack und daraus ein neuer Überzug hergestellt werden müssen.

Aus dem Kongress-Beitrag Dr. W. H. Gerber, FATIPEC 1994, Budapest, "Messung und Charakterisierung von Metallic-Lacken", ist es bekannt, objektive Beurteilungskriterien für Überzüge aufzustellen. Dazu wird Primärlicht in verschiedenen Winkeln zwischen 15° und 75° zur Normalen auf die Oberflächen von Überzügen eingestrahlt und unter 0° (Normale) das reflektierte bzw. remittierte Sekundärlicht registriert. Als Meßapparatur findet ein Goniospektrometer üblichen Aufbaus Verwendung. Die Winkelabhängigkeiten der Intensitäten des Sekundärlichtes bei den verschiedenen Einstrahlungswinkeln des Primärlichtes werden als optische Eigenschaftswerte und somit als Beurteilungskriterien für die optischen Effekte des Überzuges verwendet. Aus dieser Literaturstelle ist es weiterhin bekannt, für die Einstrahlungswinkel- und Wellenlängenabhängigkeiten der Sekundärlichtintensitäten ein theoretisches Modell aufzustellen, wobei im Kern mit der Aufstellung von überzugsspezifischen Randbedingungen (neben den meßgeometrischen Randbedingungen) für die Strahlungstransportgleichung und (numerischer) Lösung derselben gearbeitet wird. Anregungen, wie daran anschließend eine Bestimmung von Konzentrationen für optische Effekte erzeugende Lackkomponenten nach Maßgabe von Vorgaben bestimmt werden können, sind nicht entnehmbar. Insofern wird lediglich die Brauchbarkeit eines bestimmten theoretischen Ansatzes zur Beschreibung optischer Effekte von Überzügen offenbart. Zudem ist der gewählte Sekundärlichtwinkel für Effektlacke weniger geeignet, da beispielsweise goniochromatische Effekte nicht berücksichtigt werden. Der gewählte Sekundär-

lichtwinkel ist in Rahmen dieser bekannten Maßnahmen erforderlich, um eine praktikable Lösung der Strahlungstransportgleichung überhaupt erst zu ermöglichen.

Gegenüber dem eingangs genannten Verfahren liegt der Erfindung das technische Problem zugrunde, ein Verfahren anzugeben, welches zuverlässiger und auf einfachere Weise Lacke ergibt, die hinsichtlich der optischen Effekte daraus hergestellter Überzüge den Vorgaben entsprechen.

Zur Lösung dieses Problems lehrt die Erfindung ein Verfahren zur Herstellungen eines Lackes, aus welchem ein Überzug mit vorgegebenen optischen Eigenschaftswerten $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ erzeugbar ist, wobei optische Effekte erzeugende Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ mit den Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ zugeordneten optischen Eigenschaftsparametern $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots, p_x$ in Konzentrationen $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ einem optisch praktisch neutralen Bindemittel zugemischt werden, wobei die Konzentrationen $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ mittels eines Rechners unter Einsatz eines physikalischen Modells der an der Grenzfläche Luft/Überzug und im Überzugsinneren eines aus dem Lack hergestellten Überzuges mit optischen Eigenschaftswerten $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ auftretenden optischen Strahlungsprozesse bei Berücksichtigung der den Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ zugeordneten Eigenschaftsparameter $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots, p_x$ berechnet und in einer Mischverfahrenstufe eingestellt werden, und wobei das physikalische Modell im wesentlichen auf der Simulation der Trajektorien einer Mehrzahl von auf einen virtuellen Überzug mit den vorgegebenen Eigenschaftswerten $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ eingestrahelter virtueller Primärphotonen beruht. – Eigenschaftswerte im Rahmen der Erfindung sind meßtechnisch erfaßte Daten, die aus einer Erfassung von einem Überzug reflektierter und/oder remittierter optischer Strahlung, i. e. beispielsweise spektrale Reflexionswerte für verschiedene, vorzugsweise 3–5, Beleuchtungs-/Beobachtungsrichtungen (als Meßgeometrie bezeichnet) resultieren. Dabei kann grundsätzlich mit monochromatischem aber auch polychromatischem Primärlicht gearbeitet werden. Der Spektralbereich liegt beispielsweise bei 400–700 nm, besser noch bei 380–720 nm. Der Spektralbereich, die spektrale Auflösung und Meßgeometrie mit ihren Aperturen werden zweckmäßigerweise entsprechend jener handelsüblicher, für die Erfindung tauglicher Meßgeräte (z. B. Goniospektrophotometer oder Goniospektrometer) gewählt. Als optische Eigenschaftswerte gelten ebenso aus den genannten spektralen Reflexionen abgeleiteten farbmétrischen Größen. Diese werden vorzugsweise zur Beurteilung der erreichten physiologischen Genauigkeit (Grad der Angleichung an einen vorgegebenen Standard) eingesetzt. Als optische Eigenschaftsparameter der Lackkomponenten kommen in erster Linie der Abschwächungskoeffizient und/oder der Albedo in Betracht. Im Falle von Metallic-Effekt-Pigmenten ist hinsichtlich des Albedos differenzierbar zwischen isotropen und anisotropen Anteilen sowie dem Verhältnis deren Abschwächungskoeffizienten und zusätzlich kann die Kippverteilung der Metallic-Effekt-Pigmente einfließen. Im Falle von Micas können zusätzlich die Brechungsindizes und (optischen) Schichtstärken der Glimmerbasis und der Metalloxidbeschichtung eingehen. Ein virtueller Überzug ist ein computertechnisch simulierter Überzug, wobei dieser Modellüberzug durch seine Schichtdicke, Schichtart, Arten und Mengen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten und geometrische sowie physikalisch optischen Eigenschaften dieser Lackkomponenten (bzw. der jeweiligen Pigmentpartikel) definierbar ist. Es versteht sich, daß ein virtueller Überzug auch grundsätzlich mehrere Lagen aufweisen kann, wobei dann auch erforderlichenfalls optische Strahlungsprozesse an den inneren Grenzflächen berücksichtigt

werden können. Virtuelle Primärphotonen sind computertechnisch simulierte Photonen mit bestimmten (ggf. variierten) Wellenlängen und bestimmten (ggf. variierten) Einfallsrichtungen. Durch Reflexion und/oder Remission nach Maßgabe der Konzentrationen der Lackkomponenten sowie deren Eigenschaftsparameter entstehen virtuelle Sekundärphotonen, deren Bestimmung in virtuellen Empfängern (angeordnet an ggf. verschiedenen Orten und mit ggf. verschiedenen Richtcharakteristiken) die Eigenschaftsparameter ergibt. Als Trajektorien der virtuellen Photonen sind die Wege der eingestrahnten virtuellen Primärphotonen im Überzugsinneren, beginnend an der Überzugs Oberfläche, bis zur Absorption im Überzugsinneren oder bis zur Reflexion oder Remission von der Überzugs Oberfläche bezeichnet.

Die Erfindung beruht zunächst auf der Erkenntnis, daß optische Effekte eines Überzuges mittels einer Simulation der Trajektorien von Primärphotonen in einem simulierten Überzug nachgestellt werden können und daher mittels des erstellten Modells auch Vorhersagen bezüglich optischer Eigenschaftsparameter möglich sind durch Vorgabe von Konzentrationen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten. Überraschend hierbei ist, daß es nicht erforderlich ist, das grundsätzliche Strahlungstransportproblem durch Aufstellung und Lösung der Strahlungstransportgleichung für den Überzug insgesamt zu lösen. Dies ist besonders vorteilhaft, da der Aufwand zur Lösung einer realistischen Strahlungstransportgleichung für den Überzug insgesamt extrem ist und daher insbesondere bei Effekt-Lacken auch noch nicht auf befriedigende Weise gelungen ist. Die Erfindung nutzt weiterhin die Erkenntnis, daß mit Hilfe des eingesetzten Modells ausgehend von vorgegebenen objektiven Eigenschaftswerten auf die dafür erforderlichen Konzentrationen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten zurückgerechnet werden kann. Diese Erkenntnisse werden genutzt, um die Herstellung des Lackes so zu steuern, daß ein Lack erhalten wird, der einen Überzug mit bestimmten gewünschten Eigenschaftswerten ergibt.

Die Berechnung der für vorgegebene Eigenschaftswerte erforderlichen Konzentrationen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten kann im Rahmen der Erfindung auf verschiedene einfache Weisen durchgeführt werden. Beispielsweise kann im Wege der Iteration im Rahmen der Simulation solange eine Variation von Konzentrationen durchgeführt werden, bis die gewünschten Eigenschaftswerte mit hinreichender Genauigkeit eingestellt sind. Ebenso ist es möglich, bei Vorliegen von mehreren Zuordnungen Eigenschaftswerte/Konzentrationen, beispielsweise aus realen Referenzüberzügen, die Simulation auf Deckung mit diesen Zuordnungen einzustellen und zu interpolieren oder zu extrapolieren (linear oder nichtlinear, beispielsweise mit einer spline-Funktion). Für die Praxis ist es besonders empfehlenswert, mit Hilfe der Simulation, mit hohem Aufwand durchgeführt, gleichsam ein diskretisiertes Netz von Parameterzuständen (Zuordnungen) zu errechnen, dessen Dichte so gewählt wird, daß bei Interpolation zwischen Netzknoten vernachlässigbare Fehler auftreten. Damit ist es nur einmal erforderlich, mit hohem Rechenaufwand zu arbeiten, nämlich bei der Erstellung des Netzes. Im konkreten Anwendungsfall kann dann mittels des zur Verfügung stehenden Netzes und Interpolation zwischen Netzknoten zu einem allen Anforderungen genügenden Ergebnis gelangt werden, wobei der Rechenaufwand der Interpolation vergleichsweise sehr gering ist. Grundsätzlich wird es sich oft empfehlen, zumindest anhand einiger Referenzüberzüge die Simulation auf Stimmigkeit zu prüfen und ggf. zu eichen.

Gegenüber dem bekannten Verfahren, welches mit der subjektiven Beurteilung eines Koloristen und entsprechender erfahrungsgestützter Empfehlung einer Rezeptur arbei-

tet, ergeben sich verschiedene Vorteile. Zunächst arbeitet das erfindungsgemäße Verfahren unabhängig von subjektiven optischen Eindrücken menschlicher Betrachter. Dadurch ist gegenüber dem bekannten Verfahren eine stets zuverlässige Reproduzierbarkeit gewährleistet. Weiterhin ist die Zahl der erforderlichen Korrekturschritte drastisch reduziert, da zum Teil auf Anhieb eine allen Ansprüchen genügende Zuordnung vorgegebener Eigenschaftswerte/gesuchte Konzentrationen erreicht wird. Dies gilt insbesondere, wenn ausgehend von den Eigenschaftswerten und Konzentrationen eines Referenzüberzuges durch Korrektur einer oder weniger Konzentrationen die Konzentrationen der Lackkomponenten für einen Überzug mit relativ geringen Unterschieden in den optischen Eigenschaftswerten, verglichen mit dem Referenzüberzug, bestimmt werden sollen. Insofern ist das erfindungsgemäße Verfahren zudem mit vergleichsweise geringem Aufwand durchführbar.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung wird die Simulation der Trajektorien der virtuellen Primärphotonen mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode durchgeführt wird. Das Monte-Carlo-Prinzip beruht auf der Berechnung von Zufallsgrößen, die z. B. Richtungsänderungen der virtuellen Photonen bestimmen oder darüber entscheiden, ob ein Photon absorbiert oder gestreut wird. Von diesen Zufallsgrößen sind die Verteilungsfunktionen und/oder Verteilungsdichten bekannt und werden entsprechend angesetzt. Die Behandlung von Strahlungstransportproblemen mit Monte-Carlo-Methoden ist an sich grundsätzlich aus der Astrophysik und aus der Nuklearphysik bekannt, so daß bezüglich theoretischer Grundlagendetails hierauf verwiesen werden kann.

Eine vorteilhafte Ausführungsform der Erfindung ist dadurch gekennzeichnet, daß die optischen Eigenschaftswerte $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ Intensitäten des aus einer vorgegebenen Primärlichteinstrahlung resultierenden Strahlungsfeldes an vorgegebenen Empfängerorten und bei vorgegebenen Wellenlängen sind. Es hat sich gezeigt, daß die subjektiven optischen Eindrücke von menschlichen Betrachtern recht gut mit solchen objektiven Eigenschaftswerten korrelieren.

In Weiterbildung der Erfindung kann nach Messung der optischen Eigenschaftswerte $e'_1, e'_2, e'_n, \dots, e'_y$ eines zuvor hergestellten Referenzüberzuges zumindest eine Differenzkonzentration $Dc_1, Dc_2, \dots, Dc_n, \dots, Dc_z$ zu den dem Referenzüberzug zugrunde liegenden Konzentrationen $c'_1, c'_2, \dots, c'_n, \dots, c'_z$ berechnet werden. Dadurch, daß nicht sämtliche Konzentrationen neu berechnet werden brauchen, sondern nur einzelne oder gar nur eine Differenzkonzentration, ist der erforderliche Aufwand geringer. Zudem werden die Konzentrationen der Lackkomponenten für die vorgegebenen Eigenschaftswerte mit besonders hoher Zuverlässigkeit erhalten. Die optischen Eigenschaftswerte $e'_1, e'_2, \dots, e'_n, \dots, e'_y$ werden zweckmäßigerweise mittels eines Goniospektrometers bestimmt. Das im konkreten Anwendungsfall zum Einsatz kommende Gerät wird vorzugsweise bei der physikalischen Modellierung berücksichtigt. Dies ist insbesondere mit der vorzugsweise eingesetzten Monte-Carlo-Methode einfach möglich.

Insbesondere wenn Effektpigmente in den Lack bzw. den Überzug eingebaut werden sollen, empfiehlt es sich, mit einer deutlich von der Normalen zur (virtuellen) Überzugsoberfläche abweichenden (virtuellen) Primärphotoneneinstrahlung zu arbeiten, wobei an mehreren, vorzugsweise 3 bis 5, (virtuellen) Empfängerorten die optischen Eigenschaftswerte $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ gemessen werden. Dies gilt sowohl für die Simulation als auch die Messung von Referenzüberzügen.

Besonders vorteilhaft ist das erfindungsgemäße Verfahren anwendbar, wenn als Lackkomponenten neben üblichen

Pigmenten zusätzlich Metallic-Effekt- und/oder Mica-Partikel eingesetzt werden, da mit dem erfindungsgemäßen Verfahren auch goniochromatische Effekte sowie Perlack-Effekte (Micas) berücksichtigt werden können.

Im folgenden wird die Erfindung anhand eines lediglich eine Ausführungsform darstellenden Beispiels näher erläutert.

1. Grundsätze der Simulation

Die Simulation der Trajektorien erfolgt nach folgendem Grundschema:

1. Beschuß eines virtuellen Überzuges mit einem Primärphoton aus einer festgelegten Richtung (ggf. mit Simulation einer Apertur).
2. Simulation des optischen Strahlungsprozesses an der Grenzfläche Luft/Überzug (Reflexion, Transmission) und Bestimmung der neuen Bewegungsrichtung des virtuellen Photons. Bei Austritt des Photons aus dem Überzug, gehe zu 6.
3. Bestimmung der freien Weglänge des Photons im Überzug, Bestimmung der neuen Position und ggf. des getroffenen Effektpigmentpartikels. Falls die neue Position außerhalb des Überzuges liegt, gehe zu 2.
4. Simulation des eintretenden Effektes (Absorption, Richtungsänderung) Falls Absorption eingetreten ist, gehe zu 1.
5. Ermittlung der neuen Bewegungsrichtung, gehe zu 3.
6. Registrierung der aus dem Überzug herausgetretenen virtuellen Sekundärphotonen in einem geeigneten virtuellen Empfängermodul. Die Ergebnisse auf Stabilität prüfen und bei Erreichen der gewünschten Stabilität die Simulation beenden.

Die Simulation wird mittels des Monte-Carlo-Prinzips durchgeführt. Hierzu werden Zufallsgrößen berechnet, die z. B. Richtungsänderungen bestimmen oder darüber entscheiden, ob ein virtuelles Photon absorbiert oder gestreut wird. Von diesen Zufallsgrößen sind die Verteilungsfunktionen und/oder die Verteilungsdichten bekannt. Aus mit einem üblichen Algorithmus erstellten gleich verteilten Zufallszahlen können dann Zufallszahlen mit der gewünschten Verteilung beispielsweise im Wege der Transformation berechnet werden.

Die Reflexion oder Transmission eines virtuellen Photons an einer Schichtgrenze (Luft/Oberfläche oder zwischen inneren Schichten des virtuellen Überzuges) folgt dem Fresnelschen Gesetz, woraus sich der Reflexionsgrad (eine Größe zwischen 0 und 1) bestimmen läßt. Eine Zufallszahl zwischen 0 und 1 bestimmt dann, ob Reflexion oder Transmission stattfindet. Die Verteilung der freien Weglängen virtueller Photonen findet man für isotrop streuende Schichten leicht über das Abschwächungsgesetz. Das Verhalten einzelner virtueller Photonen ist dann unschwer mit einer Zufallszahl zwischen 0 und 1 simulierbar. Ebenso ist der Effekt der Albedo (Verhältnis von Streuung zur Gesamtabschwächung) im Rahmen der isotropen Streuung mit einer Zufallszahl zwischen 0 und 1 simulierbar. Mit zwei Zufallszahlen zwischen 0 und 1 kann schließlich bei Ansatz eines geeigneten Koordinatensystems die aus der isotropen Streuung resultierende Richtungsänderung eines virtuellen Photons simuliert werden. Damit sind die zur Simulation erforderlichen Eigenschaftsparameter, i. e. Albedo und Abschwächungskoeffizient, für den Fall der isotrop streuenden Überzüge hinreichend vorgegeben.

Im Falle von Effektpigmenten liegen die Verhältnisse et-

was komplexer aufgrund von Anisotropieeffekte. Im Falle von Metallic-Effekt-Pigmenten läßt sich die Anisotropie auf einen isotrop streuenden Anteil und einen anisotropen, gerichteten Anteil reduzieren. Die beiden Anteile besitzen eigene Albedos, einen isotropen Albedo (siehe oben) und einen anisotropen Albedo. Zur Behandlung des letzteren muß zunächst eine der Praxis entsprechende Verteilungsfunktion für die plättchenförmigen Metallic-Effekt-Pigmente angesetzt werden. Hierfür empfiehlt sich eine Normalverteilung um die Normale zur Überzugsoberfläche (betrachtet wird die Lage der Normalen zu den Hauptflächen der Pigmente). Wiederum müssen dann die freien Weglängen gefunden werden, was über das Abschwächungsgesetz und einen nach klassischen Theorien durchzuführenden Ansatz für den Wirkungsquerschnitt der Pigmente (welcher seinerseits abhängig von dem Winkel der einfallenden Photonen ist) gelingt. Mit einer gleich verteilten Zufallszahl zwischen 0 und 1 für den erhaltenen anisotropen Albedo kann schließlich dieser Effekt simuliert werden. Die Bestimmung der neuen Bewegungsrichtung eines reflektierten Photons erfolgt unschwer über die Lage des getroffenen Pigmentes. Im Ergebnis wird mit vier Eigenschaftsparametern gearbeitet, nämlich den Albedos der isotropen und spiegelnden Anteile, dem Verhältnis der zugeordneten Abschwächungskoeffizienten sowie der Lageverteilung der Pigmente.

Im Falle der Micas treten gegenüber den Metallic-Effekt-Pigmenten zusätzlich Transmission durch die Micas und Interferenz auf. In die Berechnung des Verhältnisses Reflexion/Transmission gehen die Brechungsindices und optischen Schichtstärken der Glimmerbasis und des umgebenden Metalloxids der Micas ein. Im Wege der Idealisierung können Schichtstärke und Brechungsindex des Glimmers konstant angesetzt werden. Als zusätzliche Eigenschaftsparameter werden jedoch Brechungsindex und Belegungsstärke für die Beschichtung der Micas benötigt. Im einzelnen folgt die entsprechende Ergänzung der Simulation den hierzu anzuwendenden physikalischen Gesetzen.

In der Praxis weisen Überzüge verschiedene optische Effekte erzeugende Lackkomponenten auf. Im Rahmen der Simulation wird hierdurch im wesentlichen die freie Weglänge der virtuellen Photonen berührt. In Uni-Lacken mit verschiedenen Farbpigmenten liegt nach wie vor isotrope Streuung vor. Der Gesamtalbedo des Überzuges ergibt sich dann aus einer linearen Zusammensetzung der Absorptions- und Streukoeffizienten der einzelnen Farbpigmentarten. Im Falle von Effekt-Lacken sind entsprechend den obigen Ausführungen die Anisotropieeffekte einzuführen.

Als virtuelle Empfänger für die virtuellen Sekundärphotonen werden Oberflächenelemente einer Einheits-Halbkugel benutzt. Im Falle der rein isotropen Streuung empfiehlt sich ein Zirkulärempfänger. Für Überzüge mit anisotrop streuenden Lackkomponenten ist ein Richtempfänger vorzusehen. Grundsätzlich sollte die virtuelle Anordnung, auch hinsichtlich der angesetzten Aperturen, der Anordnung eines realen Meßgerätes (Goniospektrometer) entsprechen.

Als Abbruchkriterium für die Simulation dient die Stabilität der Reflexion im reflexionsschwächsten Empfänger. Der Wert der Abbruchbedingung wird auf übliche Weise bestimmt und orientiert sich zweckmäßigerweise an der Meßgenauigkeit realer Meßgeräte.

2. Herstellung verschiedener Lacke nach vorgegebenen optischen Eigenschaftswerten

Im Wege der unter 1. beschriebenen Simulation wurden für verschiedene vorgegebene optische Eigenschaftswerte Konzentrationen der optische Effekte erzeugenden Lackkomponenten bestimmt. Hiernach wurden ausgehend von

einem üblichen Bindemittel Lacke hergestellt und zu Überzügen verarbeitet. Die Überzüge wurden dann mittels eines Goniospektrometers hinsichtlich ihrer optischen Eigenschaftswerte vermessen. Als Goniospektrometer wurde ein Gerät des Typs MA06 der Firma XRITE mit 4 Meßgeometrien verwendet. Die Messung, ebenso wie die Simulation, erfolgten mit folgenden Geometrien. Die Primärphotoneneinstrahlung erfolgte mit einem Winkel von 45° zur Probennormalen. Die Empfängerorte lagen bei 15°, 25°, 45° und 75° zum Glanzwinkel. Als Eigenschaftswerte wurden die Intensitäten der Sekundärphotonen bei diesen Winkeln und bei Wellenlängen der Primärphotonen zwischen 400 nm und 700 nm, in Stufen von 10 nm, angesetzt.

In den folgenden Figuren werden die real mit berechneten Konzentrationen der Lackkomponenten erhaltenen Eigenschaftswerte (durchgezogene Linien) mit den vorgegebenen Eigenschaftswerten (Punkte) verglichen. Es zeigen:

Fig. 1 den Vergleich für einen Überzug mit einem Metallic-Effekt-Pigment des Typs Alu Sparkle Silver 3500 und einem Gelb-Pigment des Typs Sandoringelb 6GL in einem Konzentrationsverhältnis 17,85 : 1 (Metallic-Effekt Pigment zu Gelb-Pigment).

Fig. 2 den Vergleich für einen Überzug mit einem Metallic-Effekt-Pigment des Typs Alu Sparkle Silver 3500 und einem Gelb-Pigment des Typs Sandoringelb 6GL in einem Konzentrationsverhältnis 3,57 : 1 (Metallic-Effekt Pigment zu Gelb-Pigment).

In den Figuren gehören die höchsten Eigenschaftswerte zur 15° Meßgeometrie, dann folgen absteigend die 25°, 45° und 75° Geometrien. Ein Vergleich der durchgezogenen Linien (Meßergebnisse) mit den vorgegebenen Eigenschaftswerten (Punkte) zeigt, daß eine sehr gute Übereinstimmung erzielt wird. Sofern die noch verbliebenen Abweichungen zu Abweichungen in den optischen Eigenschaften führen sollten, die von einem sehr farbtüchtigen menschlichen Betrachter bemerkt werden, so können unschwer und in einem einzigen Korrekturschritt Differenzkonzentrationen so berechnet werden, daß der dann demgemäß hergestellte Lack Überzüge liefert, die allen Ansprüchen hinsichtlich der Vorgaben zu den optischen Eigenschaften genügen.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Herstellungen eines Lackes, aus welchem ein Überzug mit vorgegebenen optischen Eigenschaftswerten $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_y$ erzeugbar ist, wobei optische Effekte erzeugende Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ mit den Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ zugeordneten optischen Eigenschaftsparametern $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots, p_x$ in Konzentrationen $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ einem optisch praktisch neutralen Bindemittel zugemischt werden, wobei die Konzentrationen $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_z$ mittels eines Rechners unter Einsatz eines physikalischen Modells der an der Grenzfläche Luft/Überzug und im Überzuginneren eines aus dem Lack hergestellten Überzuges mit optischen Eigenschaftswerten $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_y$ auftretenden optischen Strahlungsprozesse bei Berücksichtigung der den Lackkomponenten $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots, a_z$ zugeordneten Eigenschaftsparameter $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots, p_x$ berechnet und in einer Mischverfahrenstufe eingestellt werden, und wobei das physikalische Modell im wesentlichen auf der Simulation der Trajektonen einer Mehrzahl von auf einen virtuellen Überzug mit den vorgegebenen Eigenschaftswerten $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots, c_y$ eingestrahelter virtueller Primärphotonen beruht.
2. Verfahren nach Anspruch 1, wobei die Simulation

der Trajektorien der virtuellen Primärphotonen mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode durchgeführt wird.

3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, wobei die optischen Eigenschaftswerte $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ Intensitäten des aus einer vorgegebenen Primärlichteinstrahlung resultierenden Strahlungsfeldes an vorgegebenen Empfängerorten und bei vorgegebenen Wellenlängen sind.

4. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 3, wobei nach Messung der optischen Eigenschaftswerte $e'_1, e'_2, \dots, e'_n, \dots, e'_y$ eines zuvor hergestellten Referenzüberzuges zumindest eine Differenzkonzentration $Dc_1, Dc_2, \dots, Dc_n, \dots, Dc_z$ zu den dem Referenzüberzug zugrunde liegenden Konzentrationen $c'_1, c'_2, \dots, c'_n, \dots, c'_z$ berechnet wird.

5. Verfahren nach Anspruch 4, wobei die optischen Eigenschaftswerte $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ mittels eines Goniometers bestimmt sind.

6. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, wobei mit einer deutlich von der Normalen zur (virtuellen) Überzugsoberfläche abweichenden (virtuellen) Primärphotoneneinstrahlung gearbeitet wird und wobei an mehreren, vorzugsweise 3 bis 5, (virtuellen) Empfängerorten die optischen Eigenschaftswerte $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots, e_y$ gemessen werden.

7. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 6, wobei als Lackkomponenten neben üblichen Pigmenten zusätzlich Metallic- und/oder Mica-Partikel eingesetzt werden.

Hierzu 2 Seite(n) Zeichnungen

30

35

40

45

50

55

60

65

Fig. 1

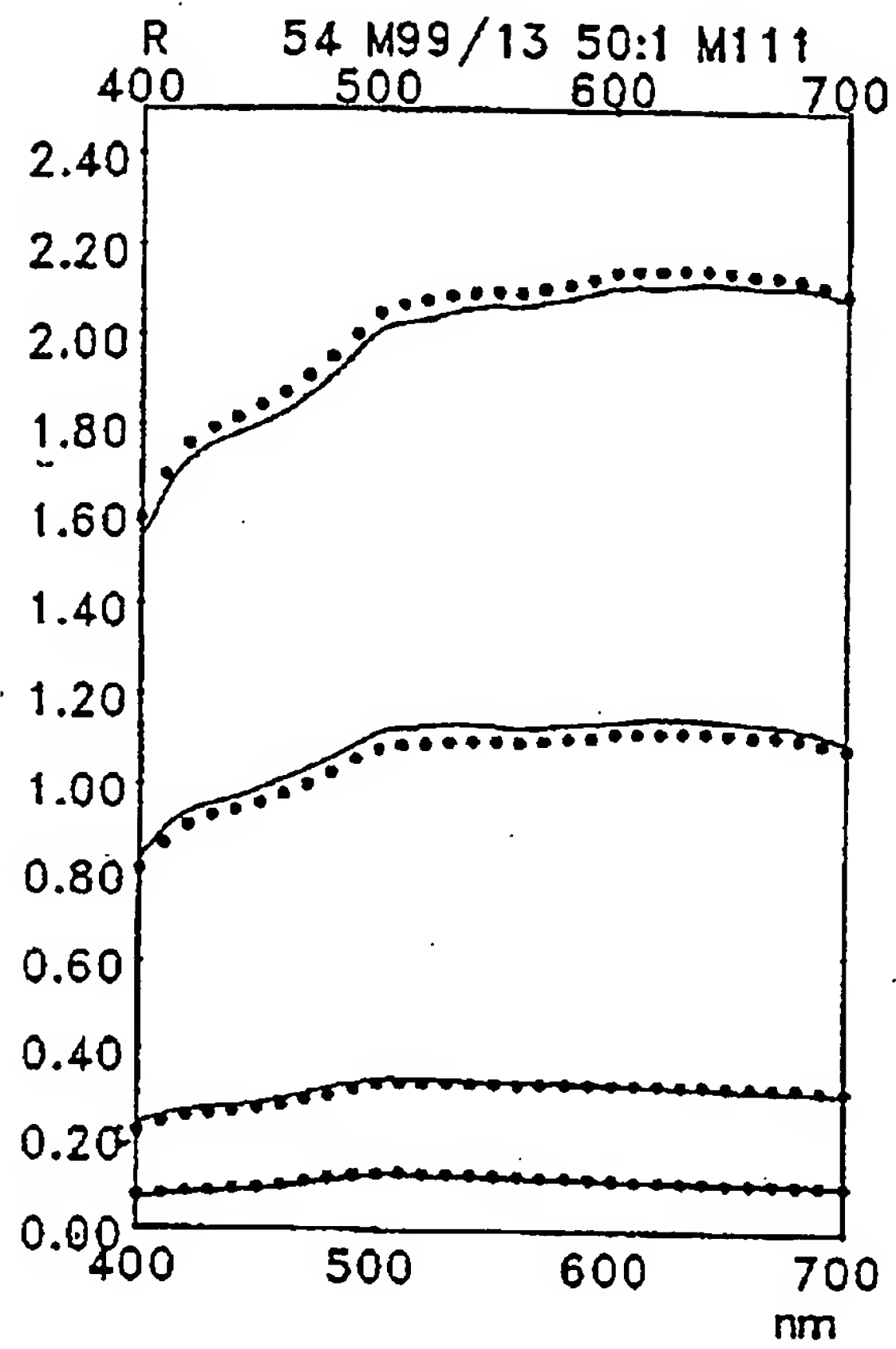


Fig. 2

